



TITLE:

強誘電体に於ける相転移の問題：秩序・無秩序型相転移に対する格子振動の影響(京都大学,<特集>修士論文で何がなされているか)

AUTHOR(S):

吉光, 浩二

---

CITATION:

吉光, 浩二. 強誘電体に於ける相転移の問題：秩序・無秩序型相転移に対する格子振動の影響(京都大学,<特集>修士論文で何がなされているか). 物性研究 1965, 4(1): 61-62

ISSUE DATE:

1965-04-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/85706>

RIGHT:

修士論文で何がなされているか  
従つてその固有値の近傍で級数展開すると Onsager 方程式からの deviation が生ずるであろう。

今後の問題として HBr 等の回転相転移を考えてみたいと思つておる。

## 強誘電体に於ける相転移の問題

— 秩序・無秩序型相転移に対する格子振動の影響 —

吉 光 浩 二 (松原研)

強誘電体に於ける相転移には変位型と秩序・無秩序型との二つがあり、これらの転移の機構は atomic な level で dynamical には解決されていない。そこで変位型の  $\text{BaTiO}_3$  と秩序無秩序型の  $\text{NaNO}_2$  について格子振動の面から調べてみた。

変位型の  $\text{BaTiO}_3$  は、格子振動の或 mode (特に波数  $k=0$ , optical mode) の不安定性により説明されているが、unharmonicity の取扱いが困難でまだ解決していない。

ここでは秩序無秩序型の  $\text{NaNO}_2$  について簡単な model をえて転移の機構を調べて見た。 $\text{NaNO}_2$  は、 $\text{NaNO}_2$  に関する body centred orthorhombic system で  $\text{NO}_2$  の配向に関する order-disorder type の相転移を行い、 $T_C = 163^\circ\text{C}$  で  $T_C$  上約  $1^\circ\text{C}$  の温度中で sinusoidal antiferro 相が存在する。分極反転は  $\text{NO}_2$  基の回転が主と考えられている。

ここで図の様に  $\text{NO}_2$  基の回転を  $b$  面内とし、 $\text{NO}_2$  基に二つの Na に一つの平衡点を仮点し、 $\text{NO}_2$  基がどちらの平衡点にいるかを (従つて向きを) 指定する変数  $P_n (= \pm 1)$  を導入

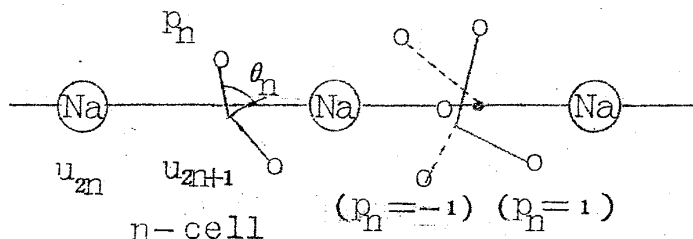


図 1

し、双極子相互作用を  $-\sum J_{nn'} P_n P_{n'}$  と表わす。更に平衡点で Na 及び NO<sub>2</sub> の重心に変位  $u_{2n}, u_{2n+1}$  を、NO<sub>2</sub> の回転に  $\theta_n$  を許すと、Hamiltonian は、双極子相互作用、格子振動及びその coupling の項で表わせる。(coupling は格子振動の一次及び二次ともにある。) 但し、atom 間にその距離  $r$  に依存する potential  $\phi(r)$  (short range + long range) と仮定した。

この結果、格子振動の方では、転移に primary に効くと予想された、変位  $u$  と回転  $\theta$  との coupling は Potential を harmonic 近似とする限り存在せず (特に波数  $k=0$  に対して) unharmonicity を考慮しても、 $u\theta\theta$ ,  $uu\theta\theta$  の type の coupling しか存在せず、重要な効果を持つとは思われない。

一方 Partition function を計算し、格子振動のみを消して、格子振動の双極子相互作用への影響を調べると、ordered state と disordered state との各 mode の frequency の違いによつて、一次転移の可能性があり、又、 $T_C$  の変化、order parameter  $S_0$  の立ち上りの変化、susceptibility  $\chi$  の変化等を引き起し、更に平衡点のずれによるひずみによつても  $T_C$  を上げる効果をもつ。

例えば、ordered state ( $T < T_C$ ) で frequency が下ると

- $T_C$  は上る。
- $S_0$  は frequency の上 ; 下に関係なく立上る。(図 2 の点線)
- $\chi$  は大きくなる (図 3)
- 平衡点のずれは常に  $T_C$  を上げる。

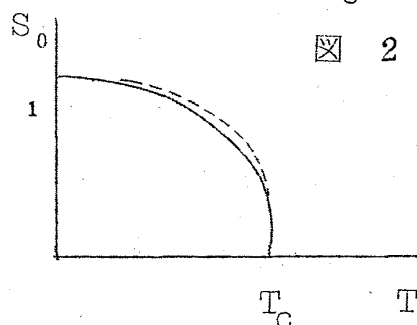


図 2

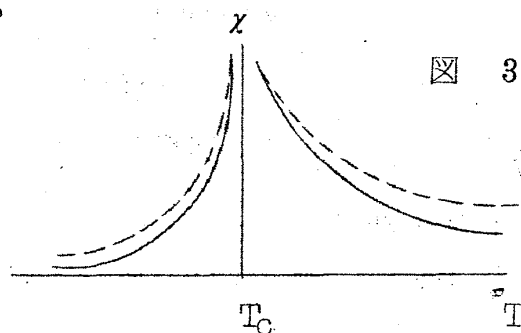


図 3

(二次転移の場合)